

相场法研究Al影响Mg-3wt%Y-1wt%Zn合金非等温凝固枝晶生长和溶质偏析

陈远超¹, 陈伟鹏¹, 裴嘉琪¹, 冯素蕊¹, 孙开心¹, 赵宇宏^{1,2,3}

- (1. 中北大学 材料科学与工程学院 新材料智能铸造先进成型山西省重点实验室
教育部共建高性能铝/镁材料开发应用协同创新中心, 山西 太原 030051)
(2. 北京科技大学 北京材料基因工程高精尖创新中心, 北京 100083)
(3. 辽宁材料实验室 材料智能技术研究所, 辽宁 沈阳 110004)

摘要: 利用多元定量相场建模, 研究了添加Al对Mg-3wt%Y-1wt%Zn合金凝固行为的影响, 重点分析了 α -Mg枝晶的生长动力学、溶质偏析及二次枝晶臂间距的调控机制。结果表明, Al的加入显著抑制 α -Mg枝晶的生长速率, 降低了固相分数增长速度。同时, Al添加有效缓解了Zn的微观偏析, 使Zn的偏析度大幅降低, 但对Y的偏析影响较小。此外, Al通过降低液相线温度、抑制溶质扩散及减小固/液界面能, 促进了二次枝晶臂的细化。成分过冷理论分析表明, 高Al含量加剧溶质富集, 导致更大的过冷度, 从而影响枝晶形核与生长。本研究有助于深入理解如何优化Mg-Y-Zn-Al合金的凝固组织、改善力学性能及耐蚀性能。

关键词: Mg-Y-Zn-Al合金; 相场模拟; 枝晶生长; 溶质偏析

中图分类号: TG146.22

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2026)05-1259-09

1 引言

与锻造镁合金相比, 铸造镁合金的密度低、加工周期短、装配成本低、设计灵活性大, 并且有机会实现部件集成, 因此在航空航天和交通运输领域有重要的用途^[1-5]。铸造稀土镁合金由于其高强度、良好的阻燃性、抗蠕变性和耐蚀性而引起了广泛的关注^[6]。其中, Mg-Y-Zn系合金因其丰富的第二相类型和优异的综合性能受到众多研究者的青睐。

Tahreen等^[7]研究认为长周期堆垛有序(LPSO)相形成是在室温和高温下开发高强度轻量级镁合金最有效的方法之一。研究显示, 较低的层错能利于LPSO相的形成。LPSO相完全受化学有序和层错控制, 所以合金元素对LPSO相有很强的变质作用^[8-12]。在Mg-Y系合金中添加了适量的Al, 可以改善合金的机械性能和耐蚀性能^[13-19]。目前, 已初步探明了Al对Mg-Y-Zn合金热稳定性的影响及其潜在机制。研究表明, 适量Al元素的加入, 使得Mg-Y-Zn合金生成了高热稳定性的Al₂Y相, 从而导致晶粒尺寸减小, 提高了合金的着火温度, 同时改善了机械性能和耐蚀性能^[16,20-21]。然而, 由于Al会抑制LPSO相的形成, 以往在高性能Mg-Re-Zn合金中Al被认为

为是有害杂质, 导致对其研究非常有限。

Liu等^[22]通过系统探究3种不同 α -Mg含量的Mg-Y-Zn铸造合金, 在773 K等温退火过程中的相组成与显微组织演变, 明确 α -Mg晶粒的存在是14H型LPSO相形成的必要条件。Drozdenco等^[23]以3种不同LPSO相体积分数的挤压态Mg-Y-Zn合金, 探究单循环“挤压-卸载-反向拉伸”变形过程中的变形机制; 结果表明, α -Mg相中的孪生-去孪生机制是影响合金后续硬化行为的关键, 且该机制的影响作用随LPSO相体积分数增加而降低。Ruan等^[24]通过CALPHAD方法设计出2种不同LPSO相含量的Mg-Y-Zn合金, 观察其铸态及500 °C不同时长等温处理后的组织演变, 并测试力学性能。得出若追求镁合金的高强度, 可以增加LPSO相的数量, 但若想保持良好的塑性, 需要保持一定数量的 α -Mg相的结论。Nishimoto等^[25]研究了通过优化常规挤压工艺调控Mg₉₇Y₂Zn合金的显微组织(动态再结晶 α -Mg晶粒、挤压态 α -Mg晶粒与挤压态LPSO晶粒), 将挤压态 α -Mg晶粒体积分数从5%增至35%, 发现合金纵向拉伸强度、断裂韧性及抗裂纹扩展能力同步提高。所以研究 α -Mg相对提高Mg-Y-Zn合金性能有较大影响。

近几十年来, 数值模拟技术的进步为研究合金凝固

收稿日期: 2025-08-02

基金项目: 国家自然科学基金(52375394, 52275390, U23A20628, 52305429); 山西省科技重大专项(202301050201004)

作者简介: 陈远超, 男, 2001年生, 硕士生, 中北大学, 山西 太原 030051, E-mail: zhaoyuhong@nuc.edu.cn

提供了一种有效的方法,补充了理论分析和实验表征。相场技术在合金凝固研究中得到了广泛应用,其优势在于无需显式追踪复杂的固液界面形貌^[26-34]。目前,Mg-Y-Zn 系合金凝固相场模拟的研究集中在 LPSO 相的形成机理和断裂机制^[35-39]。而对基体相 α -Mg 枝晶的研究较少。

Y/Zn 原子比为 2 的 Mg-Y-Zn 合金是典型的含有 LPSO 相的 Mg-RE-Zn 基合金。由于铸态 Mg-Y-Zn 系合金的显微组织主要为 α -Mg 和在晶界处分布的 18R LPSO^[40-45],可以通过研究 α -Mg 枝晶的形态进而来间接分析析出相的形态。本工作通过多元合金相场模拟,对不同 Al 含量 Mg-3wt%Y-1wt%Zn 合金的非等温凝固过程进行系统研究。重点研究了 α -Mg 多枝晶生长过程中的

$$a_s^2(\mathbf{n}) \left\{ \frac{1}{Le} + \sum_{i=1}^n M_i c_{\infty,i} [1 + (1 - k_i) U_i] \right\} \frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla \cdot [a_s^2(\mathbf{n}) \nabla \phi] + \sum_{\eta=x,y} \frac{\partial}{\partial \eta} \left[|\nabla \phi|^2 a_s(\mathbf{n}) \frac{\partial a_s(\mathbf{n})}{\partial (\partial \phi / \partial \eta)} \right] + \phi (1 - \phi^2) - (1 - \phi^2)^2 \left(\lambda_1 \tilde{T} + \sum_{i=1}^n \lambda_i M_i c_{\infty,i} U_i \right) (1 + \xi) \quad (1)$$

式中, $i = 1, 2, 3, \dots, n$ 表示不同溶质,在本工作中分别为 Y、Zn 和 Al。 $Le = D_T / D_{l,i}$, 为 Lewis 数, D_T 和 $D_{l,i}$ 分别为热扩散系数和液相溶质扩散系数, k_i 为平衡分配系数, λ_i 为时间与空间的耦合参数, M_i 为液相线斜率的标度值, $c_{\infty,i}$ 为远离固液界面的初始溶质浓度, t 为模拟时间, η 为模拟域维度, $\xi = 0.5 \Delta x \beta$, 为单个噪声项^[49], 随机数 $\beta \in [-0.5, 0.5]$, Δx 为空间步长。六方晶系的各向异性函数为: $a_s(\mathbf{n}) = 1 + \varepsilon_0 + \varepsilon_6 \cos[6(\phi - \phi_0)]$, 其中 $\phi \in [0, 2\pi]$, 为取向角, ϕ_0 为取向差角, $\varepsilon_0, \varepsilon_6$ 为晶体各向异性强度, $\mathbf{n} = -\nabla \phi / |\nabla \phi|$, 为垂直于固/液界面的单位向量。在相场控制方程中,无量纲溶质浓度 U_i 和温度 \tilde{T} 由下式给出:

$$U_i = \frac{1}{1 - k_i} \cdot \left[\frac{2c_i / c_{\infty,i}}{(1 + k_i) - (1 - k_i)\phi} - 1 \right] \quad (2)$$

$$\tilde{T} = \frac{T - T_m - \sum_{i=1}^n m_i c_{\infty,i}}{\Delta T_{0,1}} \quad (3)$$

式中, c_i 为模拟时局部实际溶质 i 的浓度, T_m 为纯 Mg 的熔点, m_i 为液相线斜率, $\Delta T_{0,i} = |m_i|(1 - k_i)c_{\infty,i}/k_i$ 为与 $c_{\infty,i}$ 相关的平衡冷却温度区间, 这里的 $\Delta T_{0,1}$ 为与 $c_{\infty,1}$ 相关的平衡冷却温度区间, U_i 场的演化方程可以表示为:

$$\left(\frac{1 + k_i}{2} - \frac{1 - k_i}{2} \phi \right) \frac{\partial U_i}{\partial t} = \nabla \cdot [D_i q(\phi) \nabla U_i - \mathbf{J}_{at}] + \frac{1}{2} [1 + (1 - k_i) U_i] \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (4)$$

式中, $D_i = D_{l,i} \tau_0 / W_0^2$ 为无量纲溶质扩散系数, $\tau_0 = \alpha_2 W_0^2 \sum_{i=1}^n \lambda_i / D_{l,i}$, 为弛豫时间, $W_0 = d_{0,i} \lambda_i / \alpha_1$, 为界面厚度, $d_{0,i} = \Gamma_i / \Delta T_{0,i}$, 为化学毛细管长度, Γ_i 为 Gibbs-Thomson 系数, $\alpha_1 = 0.8839$ 和 $\alpha_2 = 0.6267$ 为常数, $q(\phi) = (1 - \phi)/2 + k_i D_{s,i} (1 + \phi) / (2D_{l,i})$ 为插值函数,

温度场和溶质场分布, 研究不同 Al 含量对合金组织的影响, 如枝晶形态、固相分数和二次枝晶臂间距 (SDAS)。研究结果可为制备满足工程应用要求的高性能镁基材料提供理论指导。

2 相场模型

对于稀溶液, 将化学势中的亚正规模型简化为正规溶液模型或理想溶液模型, 溶质间的相互作用可以忽略。因此, 可以将多元合金体系划分为多个二元体系进行研究。综上, 本工作采用具有反溶质截留项的定量相场模型来描述非等温凝固下的 Mg-3Y-1Zn-xAl ($x=0.0, 1.0, 2.0, 3.0, 4.0, 5.0, 6.0, \text{wt}\%$) 镁合金 α -Mg 枝晶生长过程^[46-47]。定量多元相场模型序参量 ϕ 的演化方程为^[48]:

$\mathbf{J}_{at} = -1 / (2\sqrt{2}) (1 - k_i D_{s,i} / D_{l,i}) [1 + (1 - k_i) U_i] (\partial \phi / \partial t) \cdot (\nabla \phi / |\nabla \phi|)$ 为反溶质截留项, $D_{s,i}$ 为固相溶质扩散系数, \tilde{T} 场的演化方程可以表示为:

$$\frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} = \alpha \nabla^2 \tilde{T} + \frac{1}{2} \cdot \frac{L_f / c_p}{\Delta T_{0,1}} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (5)$$

式中, $\alpha = D_T \tau_0 / W_0^2$, 为无量纲热扩散系数, L_f 为熔化潜热, c_p 为比热。

采用本课题组自主开发的 Ephase 相场软件包中的凝固相场模块^[50-51]来进行模拟。模型中离散相场方程 (公式(1)) 和溶质场方程 (公式(4)) 使用有限体积法, 温度场方程 (公式(5)) 使用交替方向隐式 (ADI) 算法。相场和浓度场采用 Zero-Neumann 边界条件, 温度场采用常数边界条件^[52-53]。为了描述随机形核位置, 基于 Fortran 语言库函数 “random_seed()” 和 “random_number(p)” 提出了一种简单的晶核位置选择方案^[54]。使用 Pandat 软件的热力学数据库获取用于微观结构模拟的 Mg-3Y-1Zn-xAl ($x=0.0, 1.0, 2.0, 3.0, 4.0, 5.0, 6.0, \text{wt}\%$) 镁合金的热力学和动力学参数, 例如液相线的斜率 m_i ^[55]、分配系数 k_i 与扩散系数 $D_{s,i/l,i}$, 如表 1 所示。

3 结果与分析

与立方晶体的对称结构不同, 六方晶体的枝晶结构更为复杂, 因此模拟结果采用了全晶粒^[56]。在 Mg-3wt%Y-1wt%Zn 合金的相场模拟过程中, 单个等轴枝晶在凝固时的形态演变如图 1 所示。表现出在初始凝固阶段自由生长, 在凝固后期发生二次枝晶臂的生长和粗化的演化特点^[57]。

为了对四元合金枝晶凝固行为进行模拟研究, 阐明在界面区域内关键合金元素 (即 Y、Zn 和 Al) 的微观偏析

表1 相场模拟的物理和模型参数
Table 1 Physical and model parameters for phase-field simulation

Parameter	Value
Liquidus slope of Y, $m_1/K \cdot wt\%^{-1}$	-5.4299
Liquidus slope of Zn, $m_2/K \cdot wt\%^{-1}$	-3.6324
Liquidus slope of Al, $m_3/K \cdot wt\%^{-1}$	-5.2031
Partition coefficient of Y, k_1	0.6024
Partition coefficient of Zn, k_2	0.0562
Partition coefficient of Al, k_3	0.2900
Solute diffusion coefficient of Y in liquid, $D_{l,1}/m^2 \cdot s^{-1}$	2.4726×10^{-9}
Solute diffusion coefficient of Zn in liquid, $D_{l,2}/m^2 \cdot s^{-1}$	4.6763×10^{-9}
Solute diffusion coefficient of Al in liquid, $D_{l,3}/m^2 \cdot s^{-1}$	4.3910×10^{-9}
Solute diffusion coefficient of Y in solid, $D_{s,1}/m^2 \cdot s^{-1}$	2.6339×10^{-13}
Solute diffusion coefficient of Zn in solid, $D_{s,2}/m^2 \cdot s^{-1}$	5.1899×10^{-14}
Solute diffusion coefficient of Al in solid, $D_{s,3}/m^2 \cdot s^{-1}$	6.8042×10^{-15}
Latent heat of fusion, $L_f/J \cdot kg^{-1}$	3.66×10^5
Specific heat, $c_p/J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$	1360
Thermal diffusion coefficient, $D_T/m^2 \cdot s^{-1}$	4.7954×10^{-5}
Equilibrium temperature, T_0/K	864
Melting temperature, T_m/K	924
Condensate depression, $\Delta T_{con}/K$	60
Capillarity length, d_0/m	5.55×10^{-9}
Diffusion interface thickness, W_0/m	4.99×10^{-8}
Space step size, $\Delta x/m$	3.99×10^{-8}
Dimensionless solute concentration, $U_1(r,0) = U_2(r,0) = U_3(r,0)$	-0.55

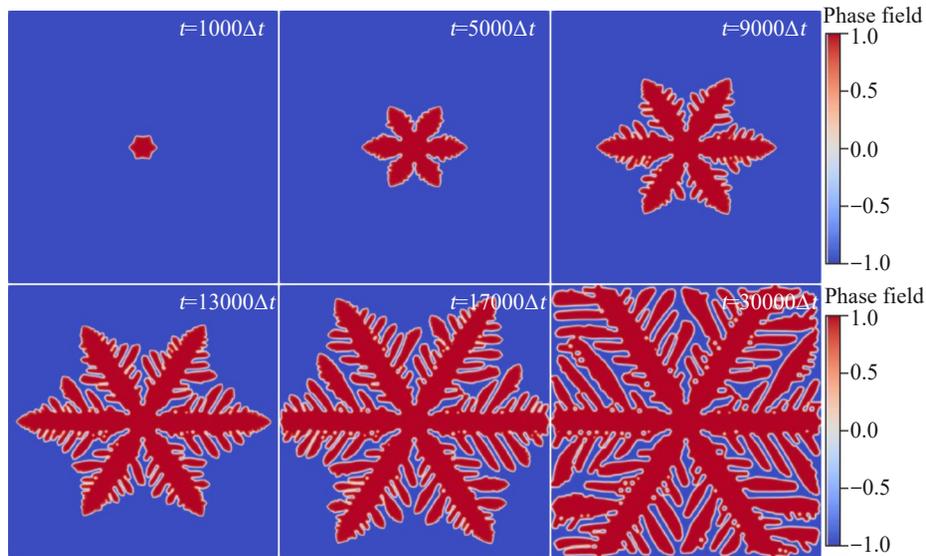


图1 Mg-3wt%Y-1wt%Zn合金α-Mg枝晶的生长过程

Fig.1 Growth process of α-Mg dendrite in Mg-3wt%Y-1wt%Zn alloy (blue regions represent the liquid phase, while the red regions correspond to α-Mg dendrites)

行为,并将它们的分布模式与潜在的凝固动力学等参数相关。随着枝晶臂的持续生长,相邻枝晶臂之间会相互竞争液相中的溶质元素,导致溶质在枝晶臂间形成显著

干)和溶质富集区(枝晶间区域)。且溶质的迁移率和扩散率的影响进一步决定了偏析的程度,由于Mg-Y、Mg-Zn和Mg-Al稀合金的平衡分配系数均小于1,所以凝固α-Mg枝晶中的溶质浓度均小于液相中的浓度。因此,溶质贫化区位于枝晶中心,富集区总是在固/液界面前沿。

图2~图4分别显示了相近固相分数(f_s)下Mg-Y-Zn-Al合金多个 α -Mg枝晶生长过程中的Y、Al和Zn溶质场分布。结果表明,在Mg-3wt%Y-1wt%Zn合金中,随着Al的添加,多 α -Mg枝晶体系的Y溶质场分布的变化规律:最大无量纲浓度($c_{max}/c_{\infty,1}$)显著降低,而最小无量纲浓度($c_{min}/c_{\infty,1}$)则呈现升高的趋势。Zn溶质场无量纲浓度随

Al含量的增加的变化趋势和Y溶质场的变化趋势一致。相较于Y,溶质Zn的偏析程度更加严重,Zn几乎都排到了液相中。Al的加入在很大程度上抑制了Zn的偏析。

值得注意的是,晶粒间的强相互作用导致溶质扩散范围扩大,造成枝晶间液相出现明显的溶质富集,使固液界面的曲率降低^[58]。在边界附近的 α -Mg枝晶,随着Al

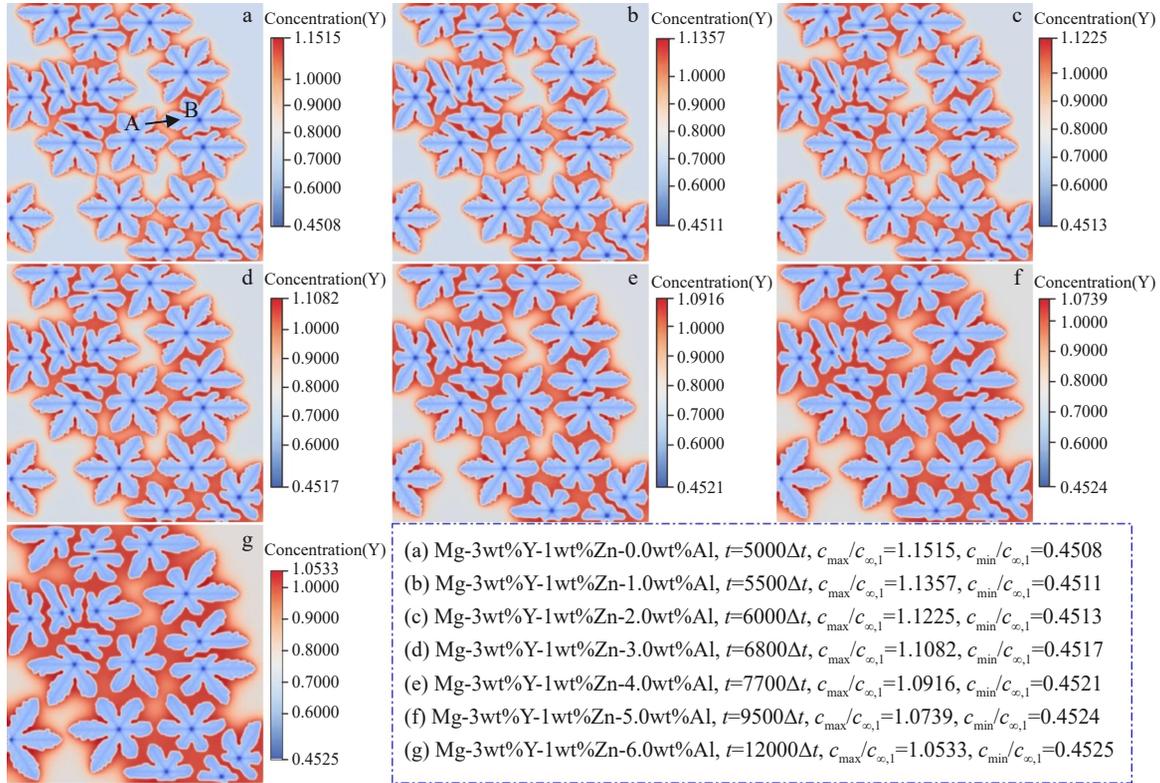


图2 相近固相分数下Mg-Y-Zn-Al合金多个 α -Mg枝晶生长过程中的Y溶质场分布

Fig.2 Y solute field distributions during multiple α -Mg dendrite growth in Mg-Y-Zn-Al alloys with similar solid fractions: (a) $f_s=0.5340$, (b) $f_s=0.5380$, (c) $f_s=0.5341$, (d) $f_s=0.5367$, (e) $f_s=0.5308$, (f) $f_s=0.5379$, and (g) $f_s=0.5349$

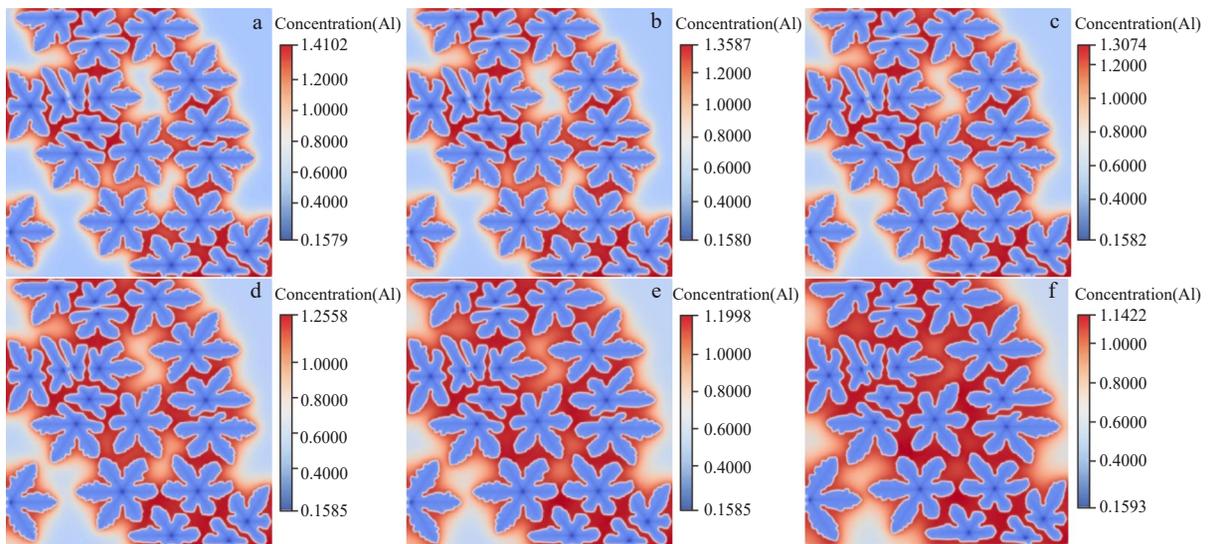


图3 相近固相分数下Mg-Y-Zn-Al合金多个 α -Mg枝晶生长过程中的Al溶质场分布

Fig.3 Al solute field distributions during multiple α -Mg dendrite growth in Mg-Y-Zn-Al alloys with similar solid fractions: (a) $f_s=0.5380$, (b) $f_s=0.5341$, (c) $f_s=0.5367$, (d) $f_s=0.5308$, (e) $f_s=0.5379$, and (f) $f_s=0.5349$

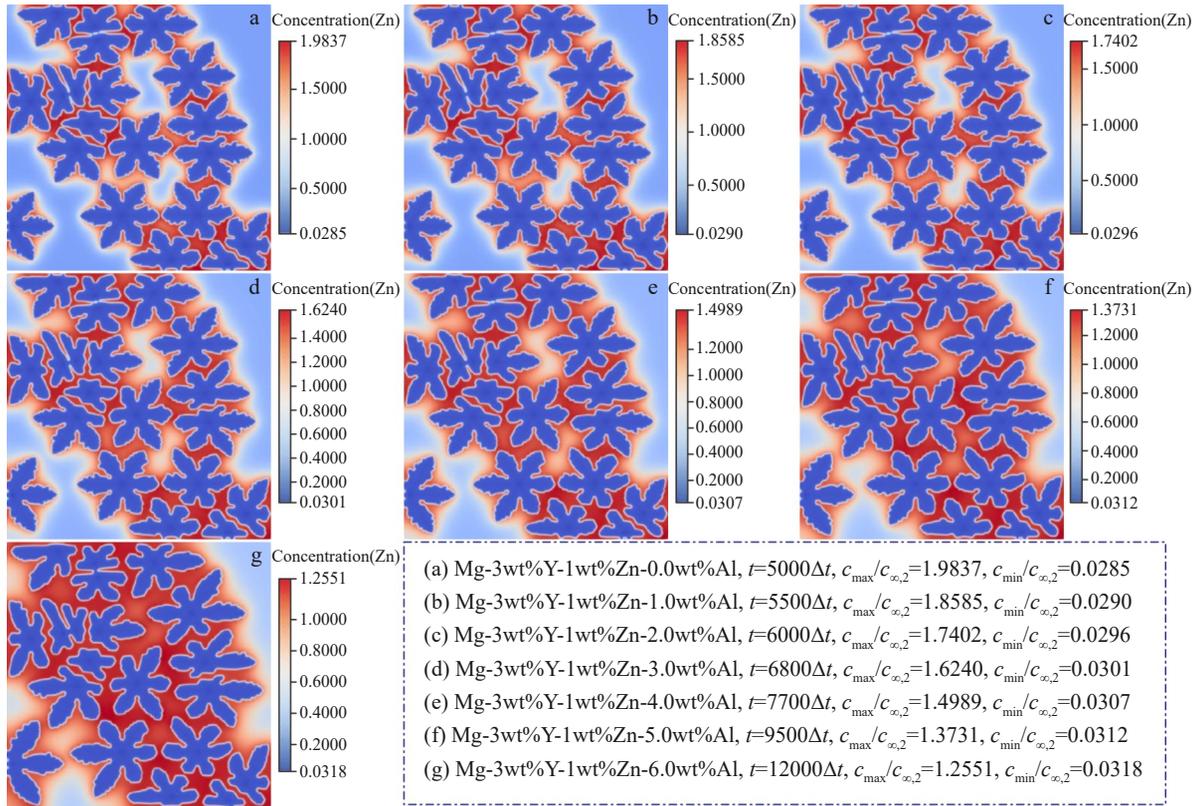


图4 相近固相分数下Mg-Y-Zn-Al合金多个 α -Mg枝晶生长过程中的Zn溶质场分布

Fig.4 Zn solute field distributions during multiple α -Mg dendrite growth in Mg-Y-Zn-Al alloys with similar solid fractions: (a) $f_s=0.5340$, (b) $f_s=0.5380$, (c) $f_s=0.5341$, (d) $f_s=0.5367$, (e) $f_s=0.5308$, (f) $f_s=0.5379$, and (g) $f_s=0.5349$

增加到6wt%(图3a~3f),二次枝晶的枝晶臂明显变短,部分二次枝晶相互融合。特别是中心区域的枝晶臂因溶质富集而发生重熔,其二次枝晶臂几乎无法形成。

图5显示了相近固相分数下Mg-Y-Zn-Al合金单个 α -Mg枝晶生长过程中的温度场分布。在添加了Al之后(图5b~5g),合金体系的最高温度从864.202 K降至864.075 K,表明Al的添加降低了合金凝固过程中的最高温度,提高了体系的过冷度。

4 讨论

4.1 Al对Mg-3wt%Y-1wt%Zn合金 α -Mg枝晶固相分数的影响

凝固微观结构形成和演变的过程通常由形核和生长两个基本阶段组成。图6显示了相场模拟单个 α -Mg枝晶和多个 α -Mg枝晶生长过程中的固相分数 f_s 的演变趋势。在早期凝固阶段,晶粒间的温度场和溶质场彼此互不影响,晶粒生长速率随着过冷度增大而增大, f_s 以不断增大的速度增加。凝固一段时间后,相枝晶间(例如,一次枝晶臂和二次枝晶臂的粗化)溶质相互作用减慢了枝晶生长,但凝固仍在进行, f_s 会继续增加,但增长率会持续降低。图6a显示了不同Al含量的单个 α -Mg枝晶生长的固相分数演化趋势,可以发现,Al的加入会降低固相

分数的增长速度,同时也会降低凝固到平衡温度时的固相分数,且Al含量越高, α -Mg枝晶生长的速度会越慢。图6b为多个 α -Mg枝晶生长的固相分数演化趋势。相较于单个 α -Mg枝晶生长趋势,由于初始时,各个枝晶间的相互影响较小,各晶粒自由生长,所以在凝固初始阶段,固相分数增长很快,到约 $t=15\ 000\Delta t$ 时,增速缓慢下降,最后接近平衡。这是由于Al的加入量越多,越会加剧固/液界面液相侧前沿的溶质富集程度,抑制了 α -Mg枝晶的生长。这种降低可以归因于Y、Zn和Al之间的反应,在凝固过程中,初生 Al_2Y 相优先在液相中的微小界面(如气泡、杂质颗粒)处形核^[59]。随着凝固的进行,高Al含量的合金中,未参与 Al_2Y 形成的Zn原子会通过置换固溶机制融入 Al_2Y 晶格,生成 $(Al,Zn)_2Y$ 相。 $(Al,Zn)_2Y$ 相作为异质形核核心,会与 α -Mg枝晶竞争液相中的溶质(Al、Y、Zn)和形核位点。减少了 α -Mg枝晶生长所需的溶质供应^[17,60],所以Al的加入量越多,会抑制 α -Mg枝晶的生长。生长限制因子^[61]常用来量化溶质对晶粒尺寸的影响,

$$Q = \left. \frac{d\Delta T}{df_s} \right|_{f_s \rightarrow 0} = \sum_i m_i c_{\infty,i} (k_i - 1).$$

当晶核数密度一定时,晶粒尺寸与 $1/Q$ 呈线性关系。由于Al在Mg中的 m_{Al} 和 (k_i-1) 都是负值,所以 Q 随着浓度的增加单调增加。所以,也验证了之前的结论,Al浓度越高,对 α -Mg枝晶

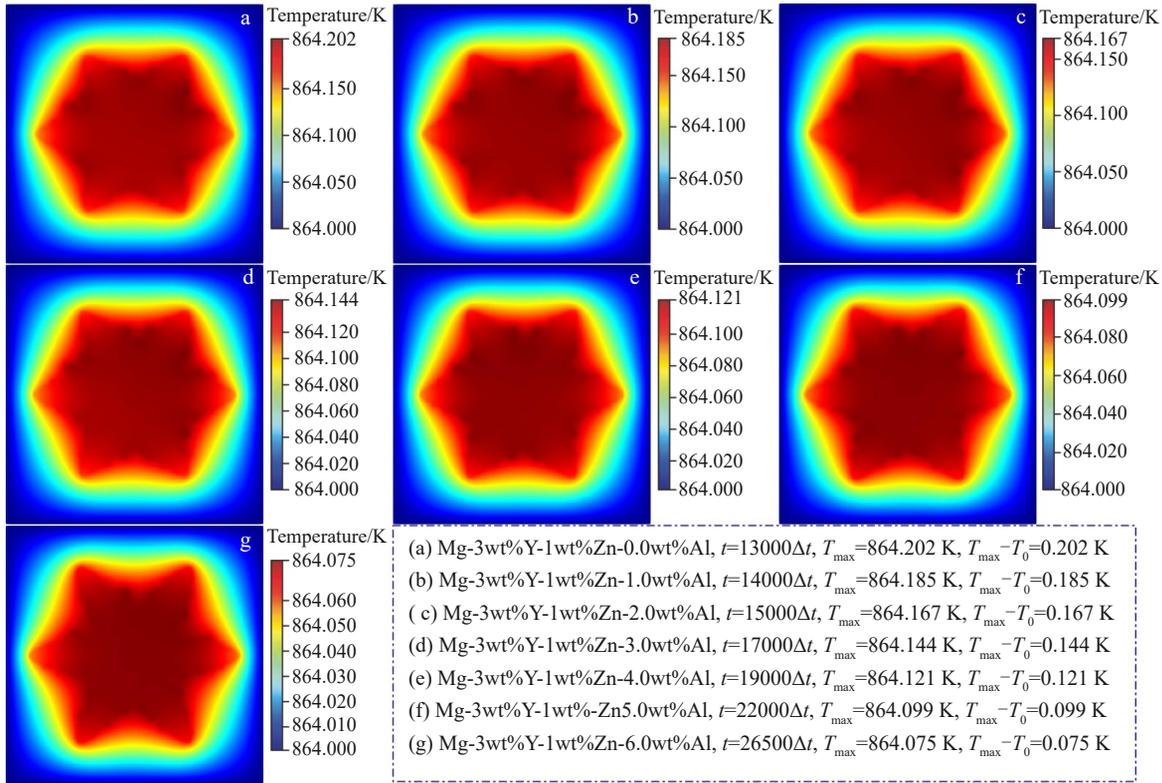


图5 相近固相分数下Mg-Y-Zn-Al合金单个 α -Mg枝晶生长过程中的温度场分布

Fig.5 Temperature field distributions during single α -Mg dendrite growth in Mg-Y-Zn-Al alloy with similar solid fractions: (a) $f_s=0.2255$, (b) $f_s=0.2270$, (c) $f_s=0.2235$, (d) $f_s=0.2295$, (e) $f_s=0.2257$, (f) $f_s=0.2234$, and (g) $f_s=0.2285$

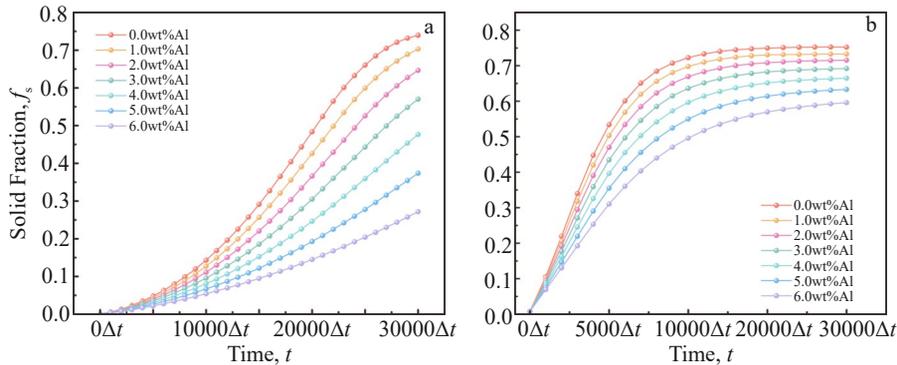


图6 不同Al含量的Mg-Y-Zn-Al合金 α -Mg枝晶生长的固相分数演化

Fig.6 Evolutions of solid fraction during α -Mg dendrite growth in Mg-Y-Zn-Al alloys with different Al contents: (a) single dendrite and (b) multiple dendrites

生长的抑制作用越强。

4.2 Al对Mg-3wt%Y-1wt%Zn合金 α -Mg枝晶微观偏析的影响

合金凝固过程中的微观偏析对铸件的力学性能、耐腐蚀性能和宏观偏析的形成都有着重要影响，一直是材料和冶金科学研究的热点。在相场模拟中，添加合金元素对溶质微观偏析的影响，包括枝晶间液相中的最大浓度 c_{\max} ，固相枝晶核心中的最小浓度 c_{\min} 以及溶质偏析度 $S_f = c_{\max}/c_{\min}$ 。其中最大浓度 c_{\max} 和最小浓度 c_{\min} 在上文中已经讨论过，在此讨论Al添加对溶质偏析度 S_f 的影响。如图7b所示，Al的添加对Zn在Mg-3wt%Y-1wt%Zn合金中

的偏析程度影响很大。当Al添加量达到6.0wt%时，相较于未添加Al时，Zn的偏析度降低了约57%，促进了Zn在 α -Mg枝晶的固溶。Al的添加对Y的偏析的作用很小。基于成分过冷理论， $G_1/v \leq \sum_{i=1}^N \frac{m_i c_{\infty,i} (1 - k_i)}{D_{l,i} k_i}$ 。 G_1 为液相实际温度梯度， v 为凝固速度， m_i 为第 i 种溶质的液相线斜率， $c_{\infty,i}$ 为溶质的初始浓度， k_i 为溶质的平衡分配系数， $D_{l,i}$ 为溶质 i 在液相中的扩散系数。添加不同含量的Al后， $c_{\infty,3}$ 增大，故方程两端的差值也变大，溶质富集增大了液相线温度下降的幅度，越容易发生过热。溶质扩散被抑制，缓解了偏析。Al含量越高，液相线温度 T_1 下

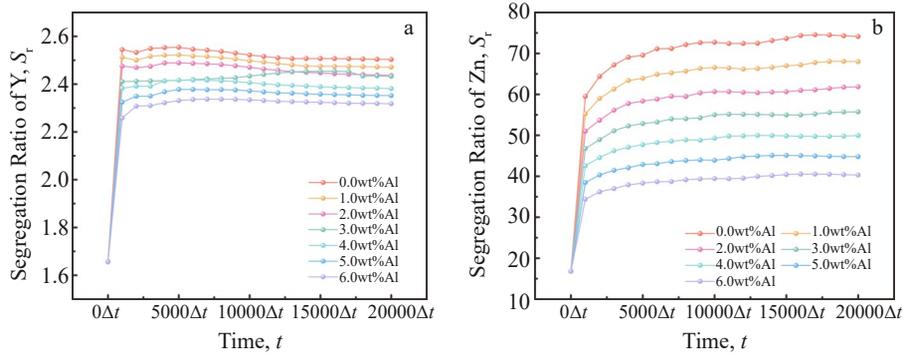


图7 不同Al含量的Mg-Y-Zn-Al合金多个 α -Mg枝晶生长的溶质偏析度演化

Fig.7 Evolution of solute segregation ratio of Y (a) and Zn (b) during multiple α -Mg dendrite growth in Mg-Y-Zn-Al alloys with different Al contents

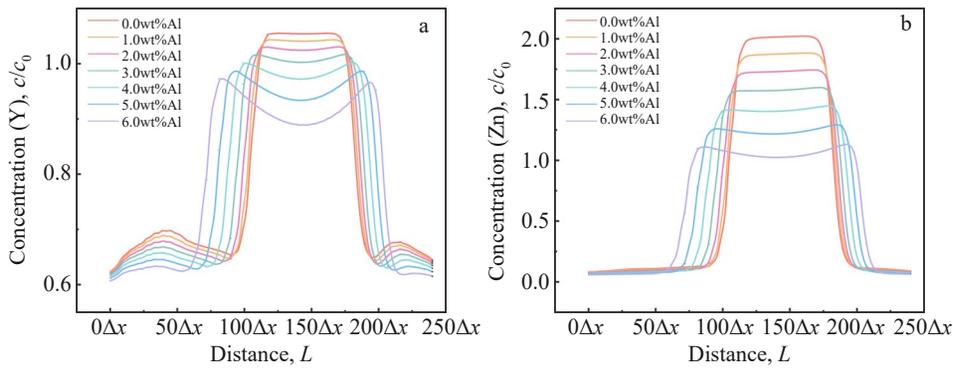


图8 不同时间下图2a中A-B线上溶质浓度分布

Fig.8 Solute concentration profiles along line A-B in Fig.2a at different time steps: (a) Y and (b) Zn

降越多,实际温度梯度 G_1 更易低于 ΔT_1 , 导致成分过冷 ΔT_{CS} 增大,高Al合金需要更大过冷度驱动非均匀形核。随着Al含量的增加,Y和Zn的液相浓度降低(如图8所示),这是由于 $(Al,Zn)_2Y$ 相以不连续块状或针状形态分布于晶界^[62-63]。 $(Al,Zn)_2Y$ 相的生成,也改变了溶质原子的扩散路径,其晶界分布阻碍溶质原子的长程扩散,溶质扩散由以晶界扩散为主转为体扩散^[59,64]。且相图中 $(Al,Zn)_2Y$ 相的稳定存在区间随Al含量增加而扩大,与模拟中Al含量越高,Zn偏析缓解越显著的结果匹配。

4.3 Al对Mg-3wt%Y-1wt%Zn合金 α -Mg枝晶二次枝晶臂的影响

在凝固末期,由于凝固相的高体积分数,具有高浓度的溶质元素通常富集在液相中。因此,凝固末期溶质元素的扩散和分布对二次枝晶臂的形貌有重要影响。此外,从系统能量的角度来看,由于二次枝晶臂的存在,固相晶粒具有较大的表面积,因此界面能的变化势必会影响二次枝晶臂的形成和粗/细化。二次枝晶臂周围液相中的总溶质成分也会减少(如图8所示)。在这些情况下,理论上尚未凝固的残余液相具有更大的萌生二次枝晶臂的倾向,这将导致二次枝晶臂的细化。另一方面,Al在Mg-3wt%Y-1wt%Zn合金的添加使基体 α -Mg枝晶更倾向于增加其比表面积(如图9所示),也就说明Al的添

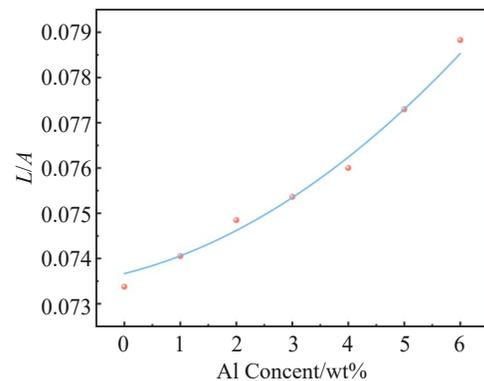


图9 多晶凝固 $t = 10000\Delta t$ 时的固-液界面的长度与枝晶面积的比率
Fig.9 Ratio of solid-liquid interface length to dendrite area (L/A) during polycrystalline solidification at $t = 10000\Delta t$

加会使合金的液相和固相间的界面能降低,会导致二次枝晶臂的细化。

上述分析表明,Al的添加将会引起Mg-3wt%Y-1wt%Zn合金 α -Mg枝晶二次枝晶臂的细化。但需要注意的是,由于当前相场模拟的拟合参数各溶质的扩散系数保持恒定,不能准确地表达Mg-3wt%Y-1wt%Zn合金真实凝固过程二次枝晶臂演化的过程。但上述相关性有效地证明了溶质扩散对二次枝晶臂演化的影响。

5 结论

1) Al对 α -Mg枝晶生长的抑制作用。Al的加入显著降低了 α -Mg枝晶的固相分数增长速度,并减少了平衡凝固时的最终固相分数。高Al含量加剧了固/液界面处的溶质富集,阻碍 α -Mg枝晶的生长,验证了成分过冷理论的预测。

2) Al的添加显著降低了Zn的偏析度,促进了Zn在 α -Mg枝晶中的固溶,但对Y的偏析影响较小。这表明Al主要通过改变Zn的扩散行为或形成Al-Y-Zn金属间化合物(如 $(Al,Zn)_2Y$)来调控偏析。成分过冷效应导致高Al合金液相线温度下降,溶质扩散被抑制,从而缓解局部偏析。

3) Al的加入降低了残余液相中的溶质浓度,有更大的趋势萌生二次枝晶臂,且Al的加入降低了固/液界面能,进一步促进二次枝晶臂的比表面积增加,导致其细化。

参考文献 References

- [1] Agnew S R, Nie J F. *Scripta Materialia*[J], 2010, 63(7): 671
- [2] Xin Tongzheng, Zhao Yuhong, Mahjoub Reza et al. *Science Advances*[J], 2021, 7(23): eabf3039
- [3] Bai Jingying, Yang Yan, Wen Chen et al. *Journal of Magnesium and Alloys*[J], 2023, 11(10): 3609
- [4] Li Yongfeng, Zhang Ang, Li Chuangming et al. *Journal of Materials Research and Technology*[J], 2023, 26: 2919
- [5] Dong Guowen(董国文), Wang Wenli(王文礼), Zhao Di(赵迪) et al. *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2025, 54(9): 2352
- [6] Wu Guohua, Wang Cunlong, Sun Ming et al. *Journal of Magnesium and Alloys*[J], 2021, 9(1): 1
- [7] Tahreen N, Zhang D F, Pan F S et al. *Journal of Materials Science & Technology*[J], 2018, 34(7): 1110
- [8] Ke Jing(柯静), Guo Lintong(郭林通). *Materials China*(中国材料进展)[J], 2024, 43(4): 336
- [9] Xue Heng, Lyu Jinbei, Wang Fengxue et al. *Advances in Materials Science and Engineering*[J], 2021, 2021(1): 8922503
- [10] Gao Junjie, Chen Yu'an, Wang Yi. *Materials Science and Engineering A*[J], 2018, 711: 334
- [11] Wu Shouzhong, Ma Yanbin, Zhang Jinshan et al. *Advanced Engineering Materials*[J], 2017, 19(7): 1600839
- [12] Fan Touwen, Tang Biyu, Peng Liming et al. *Scripta Materialia*[J], 2011, 64(10): 942
- [13] Qiu Dong, Zhang Mingxing, Taylor John Andrew et al. *Acta Materialia*[J], 2009, 57(10): 3052
- [14] Kim Do Hyung, Lee Ju Yeon, Lim Hyun Kyu et al. *Materials Science and Engineering A*[J], 2008, 487(1-2): 481
- [15] Tan Xinghe, Chee Keat How Winston, Chan Kwok Weng Jimmy et al. *Materials & Design*[J], 2015, 83: 443
- [16] Tan Xinghe, Chee Winston, Chan Jimmy et al. *Metals and Materials International*[J], 2017, 23: 699
- [17] Liu Zili, Liu Guodong, Liu Xiqin et al. *Materials Research Express*[J], 2019, 6(10): 106562
- [18] Zhao Di, Chen Xianhua, Li Jianbo et al. *Materials Science and Engineering A*[J], 2022, 831: 142242
- [19] Yu Xin, Li Yafeng, Bai Yang et al. *Materials Science and Engineering A*[J], 2024, 892: 146106
- [20] Yu Xin, Li Yafeng, Bai Yang et al. *Materials Letters*[J], 2024, 357: 135740
- [21] Yu Mingdi(于铭迪), Ying Tao(应韬), Wang Jingya(王静雅) et al. *Materials China*(中国材料进展)[J], 2025, 44(8): 701
- [22] Liu Huan, Xue Feng, Bai Jing et al. *Journal of Materials Science & Technology*[J], 2016, 32(12): 1267
- [23] Drozdenko Daria, Farkas Gergely, Šimko Pavol et al. *Crystals*[J], 2021, 11(1): 11
- [24] Ruan Yongxin, Xia Shibing, Li Changrong et al. *Journal of Alloys and Compounds*[J], 2023, 965: 171414
- [25] Nishimoto Soya, Yasuda Taiga, Hagihara Koji et al. *Journal of Alloys and Compounds*[J], 2025, 1036: 182027
- [26] Zhang Jianbao, Wang Haifeng, Kuang Wangwang et al. *Acta Materialia*[J], 2018, 148: 86
- [27] Kuang Wangwang, Wang Haifeng, Li Xin et al. *Acta Materialia*[J], 2018, 159: 16
- [28] Xin Tongzheng, Tang Song, Ji Fan et al. *Acta Materialia*[J], 2022, 239: 118248
- [29] Chen Longqing, Zhao Yuhong. *Progress in Materials Science*[J], 2022, 124: 100868
- [30] Guo Qingwei, Hou Hua, Wang Kaile et al. *npj Computational Materials*[J], 2023, 9(1): 185
- [31] Zhao Yuhong, Xing Hui, Zhang Lijun et al. *Acta Metallurgica Sinica (English Letters)*[J], 2023, 36(11): 1749
- [32] Zhao Yuhong. *npj Computational Materials*[J], 2023, 9(1): 94
- [33] Pei Xiaolong, Pei Jiaqi, Hou Hua et al. *npj Computational Materials*[J], 2025, 11(1): 27
- [34] Xu Xiaotao, Song Zhuo, Wang Kaile et al. *Journal of Materials Science & Technology*[J], 2025, 219: 307
- [35] Narita K, Koyama T, Tsukada Y. *Journal of the Japan Institute of Metals*[J], 2012, 76(8): 475
- [36] Koyama T, Tsukada Y, Narita K. *Materials Transactions*[J], 2015, 56(7): 937
- [37] Shuai Chuan, Liu Wei, Li Huanqing et al. *International Journal of Plasticity*[J], 2023, 170: 103772
- [38] Liu Wenyu, Liu Wei, Song Zhuo et al. *Materials Research Letters*[J], 2025, 13(5): 465
- [39] Sun Weizhao, Yan Rui, Zhang Yizhong et al. *Computational Materials Science*[J], 2019, 160: 149
- [40] Shao Xiaohong, Yang Zhiqing, Ma Xiuliang. *Acta Materialia*[J], 2010, 58(14): 4760
- [41] Shi Xuezhi, Long Yunqian, Zhang Huiqiu et al. *Materials*[J], 2019, 12(3): 498
- [42] Okuda Hiroshi, Kintsu Kohei, Kurokawa Shu et al. *Acta Materialia*[J], 2023, 253: 118963

- [43] Gong Yuan, He Junguang, Wen Jiuba *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering*[J], 2023, 52(2): 508
- [44] Lu Xianzheng, Chen Zijian, Zou Xianjun *et al.* *Metals and Materials International*[J], 2024, 30(11): 3141
- [45] Liu Mingming, Pang Hao, Li Quanan *et al.* *Journal of Materials Engineering and Performance*[J], 2024, 33(17): 8804
- [46] Ramirez J C, Beckermann C, Karma A *et al.* *Physical Review E*[J], 2004, 69(5): 051607
- [47] Ohno Munekazu, Matsuura Kiyotaka. *Physical Review E*[J], 2009, 79(3): 031603
- [48] Pei Jiaqi, Chen Weipeng, Zhang Wenda *et al.* *Journal of Materials Research and Technology*[J], 2023, 27: 5615
- [49] Ji K, Dorari E, Clarke A J *et al.* *Physical Review Letters*[J], 2023, 130(2): 026203
- [50] Zhao Yuhong, Xin Tongzheng, Tang Song *et al.* *MRS Bulletin*[J], 2024, 49(6): 613
- [51] Zhao Yuhong. *Materials Genome Engineering Advances*[J], 2024, 2(2): e44
- [52] Chen Weipeng, Hou Hua, Zhang Yuntao *et al.* *Chinese Physics B*[J], 2023, 32(11): 118103
- [53] Chen Weipeng, Zhao Yuhong, Yang Shuai *et al.* *Advanced Composites and Hybrid Materials*[J], 2021, 4(2): 371
- [54] Chen Weipeng(陈伟鹏). *Phase-Field Study of α -Mg Solidification Dendrite Growth in Mg-Zn-(Al) Alloy* (Mg-Zn-(Al)合金 α -Mg凝固枝晶生长相场法研究)[D]. Taiyuan: North University of China, 2023
- [55] Chen Weipeng, Hou Hua, Zhang Yuntao *et al.* *Journal of Materials Research and Technology*[J], 2023, 24: 8401
- [56] Sun Kaixin, Chen Weipeng, Pei Jiaqi *et al.* *Journal of Materials Research and Technology*[J], 2024, 28: 2855
- [57] Bogno A, Nguyen-Thi H, Reinhart G *et al.* *Acta Materialia*[J], 2013, 61(4): 1303
- [58] Zhao Yuhong, Liu Kexin, Hou Hua *et al.* *Materials & Design*[J], 2022, 216: 110555
- [59] Chang Haiwei, Qiu Dong, Taylor John Andrew *et al.* *Journal of Magnesium and Alloys*[J], 2013, 1(2): 115
- [60] Tan Xinghe, Chee Keat How Winston, Chan Kwok Weng Jimmy *et al.* *Materials Science and Engineering A*[J], 2015, 644: 405
- [61] Johnsson Mats, Bäckerud Lennart. *International Journal of Materials Research*[J], 1996, 87(3): 216
- [62] Xie Huanjian, Liu Zili, Liu Xiqin *et al.* *Materials Letters*[J], 2022, 317: 132111
- [63] Zhang Guojia, Wang Yue, Liu Zheng *et al.* *Journal of Magnesium and Alloys*[J], 2019, 7(2): 272
- [64] Xie Huanjian, Yin Xinjian, Xu Luyan *et al.* *Scientific Reports*[J], 2025, 15(1): 6711

Phase-Field Study of Al Addition Effects on Dendritic Growth and Solute Segregation During Non-Isothermal Solidification of Mg-3wt%Y-1wt%Zn Alloy

Chen Yuanchao¹, Chen Weipeng¹, Pei Jiaqi¹, Feng Surui¹, Sun Kaixin¹, Zhao Yuhong^{1,2,3}

(1. MOE Jointly Collaborative Innovation Center for High-Performance Al/Mg Based Materials, Shanxi Key Laboratory of Intelligent Casting and Advanced Forming for New Materials, School of Materials Science and Engineering, North University of China, Taiyuan 030051, China)

(2. Beijing Advanced Innovation Center for Materials Genome Engineering, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China)

(3. Institute of Materials Intelligent Technology, Liaoning Academy of Materials, Shenyang 110004, China)

Abstract: A multi-component quantitative phase-field model was developed to investigate the influence of the Al addition on the solidification behavior of Mg-3wt%Y-1wt%Zn alloy. The study focused on the growth kinetics, solute segregation, and controlling mechanism of secondary dendrite arm spacing (SDAS) of α -Mg dendrites. The results show that Al addition significantly suppresses the growth rate of α -Mg dendrites and reduces the growth rate of solid fraction. Moreover, Al effectively mitigates Zn microsegregation, substantially decreasing the segregation ratio, while having only a minor effect on Y segregation. Furthermore, Al promotes SDAS refinement by lowering the liquidus temperature, inhibiting solute diffusion, and reducing solid/liquid interfacial energy. Constitutional undercooling analysis indicates that higher Al content enhances solute accumulation, leading to increased undercooling, thereby altering dendritic nucleation and growth. This study provides valuable insights for optimizing the solidification microstructure and enhancing the mechanical properties and corrosion resistance of Mg-Y-Zn-Al alloys.

Key words: Mg-Y-Zn-Al alloy; phase-field simulation; dendritic growth; solute segregation

Corresponding author: Zhao Yuhong, Ph. D., Professor, MOE Jointly Collaborative Innovation Center for High-Performance Al/Mg Based Materials, Shanxi Key Laboratory of Intelligent Casting and Advanced Forming for New Materials, School of Materials Science and Engineering, North University of China, Taiyuan 030051, P. R. China, E-mail: zhaoyuhong@nuc.edu.cn